

(19) 日本国特許庁(JP)

## (12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第5746162号  
(P5746162)

(45) 発行日 平成27年7月8日(2015.7.8)

(24) 登録日 平成27年5月15日(2015.5.15)

(51) Int.Cl.	F 1		
<i>H01L 51/50</i>	<i>(2006.01)</i>	<i>H05B</i>	<i>33/14</i>
<i>C07D 403/04</i>	<i>(2006.01)</i>	<i>H05B</i>	<i>33/22</i>
<i>C09K 11/06</i>	<i>(2006.01)</i>	<i>H05B</i>	<i>33/22</i>
<i>G09F 9/30</i>	<i>(2006.01)</i>	<i>C07D</i>	<i>403/04</i>
<i>H01L 27/32</i>	<i>(2006.01)</i>	<i>C09K</i>	<i>11/06</i>

請求項の数 11 (全 37 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2012-517398 (P2012-517398)	(73) 特許権者	500005066 チエイル インダストリーズ インコーポ レイテッド 大韓民国 730-710 キョンサンブ ッド クミーシ コンダンードン 290
(86) (22) 出願日	平成22年6月25日(2010.6.25)	(74) 代理人	110000671 八田国際特許業務法人
(65) 公表番号	特表2012-531737 (P2012-531737A)	(72) 発明者	ジュン, スンヒュン 大韓民国, 437-711 キョンギード , イワンーシ, コチョンードン 332- 2, チエイル インダストリーズ インコ ーポレイテッド
(43) 公表日	平成24年12月10日(2012.12.10)		
(86) 国際出願番号	PCT/KR2010/004156		
(87) 国際公開番号	W02010/151083		
(87) 国際公開日	平成22年12月29日(2010.12.29)		
審査請求日	平成25年4月17日(2013.4.17)		
(31) 優先権主張番号	10-2009-0057234		
(32) 優先日	平成21年6月25日(2009.6.25)		
(33) 優先権主張国	韓国(KR)		

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】有機光電子素子用化合物、それを含む有機発光ダイオード、および前記有機発光ダイオードを含む表示装置

## (57) 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

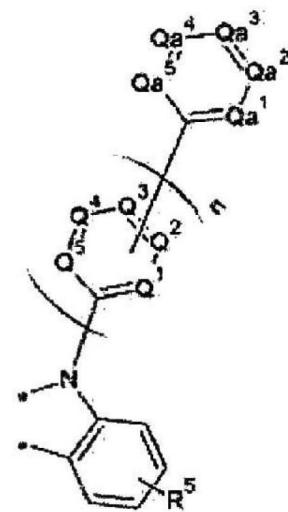
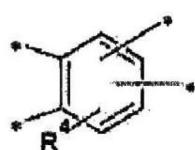
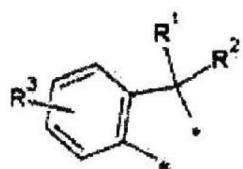
下記の化学式 1 ~ 3 で表される置換基が順次に結合される、有機光電子素子用化合物(ただし、下記の化合物(1) ~ 化合物(18)を除く) :

【化1】

[化学式1]

[化学式2]

[化学式3]



10

前記化学式1～3において、

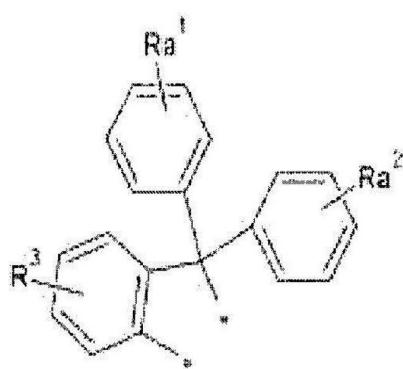
前記化学式1は、下記の化学式1aで表され、

前記化学式3は、下記の化学式3aで表され、

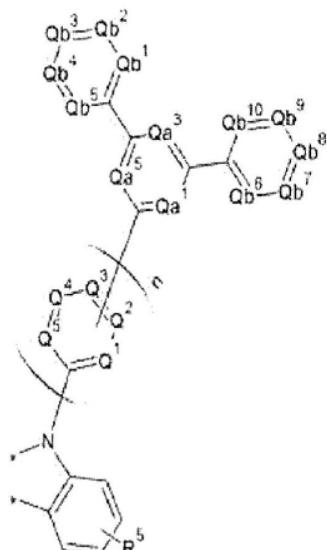
【化2】

20

[化学式1a]



[化学式3a]



30

前記化学式1a、2、3aにおいて、

R<sup>3</sup>～R<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

R<sup>a1</sup>およびR<sup>a2</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

Q<sup>1</sup>～Q<sup>5</sup>、およびQ<sup>b1</sup>～Q<sup>b10</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCRであり、ここで、前記Rは、水素、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール

40

50

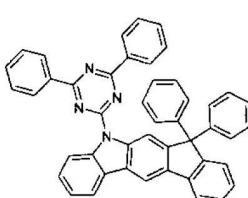
基またはこれらの組み合わせであり、

$Q a^1$ 、 $Q a^3$ 、および $Q a^5$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはC Hであり、但し、 $Q a^1$ 、 $Q a^3$ 、および $Q a^5$ の中で選択された1個以上はNであり、

nは、0～5の整数である。

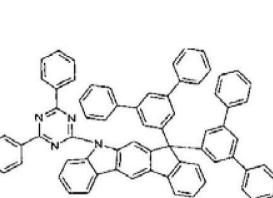
## 【化3】

化合物 (1)



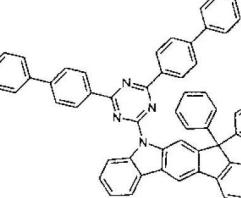
化合物 (5)

化合物 (2)



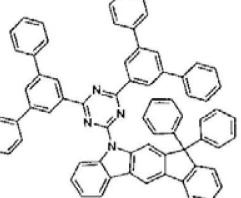
化合物 (6)

化合物 (3)



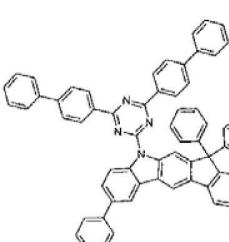
化合物 (7)

化合物 (4)

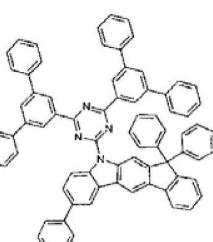


化合物 (8)

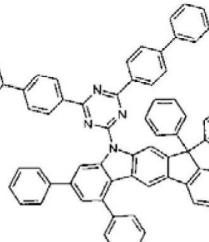
10



化合物 (9)

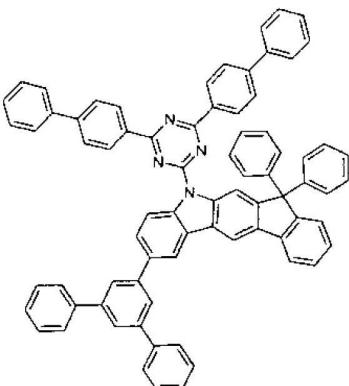


化合物 (10)

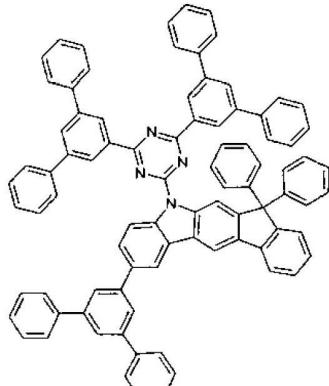


化合物 (11)

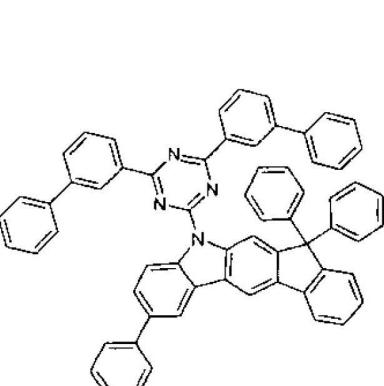
20



化合物 (12)

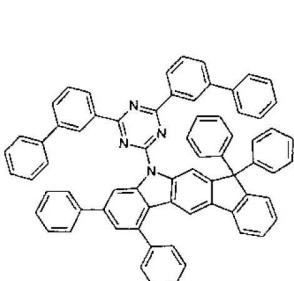


化合物 (13)

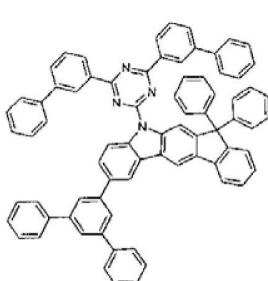


化合物 (14)

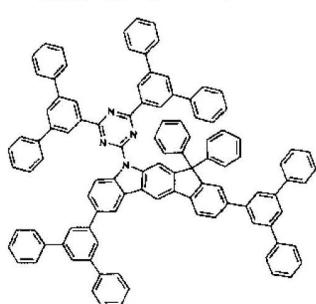
30



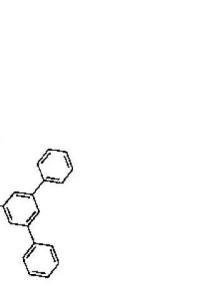
化合物 (15)



化合物 (16)

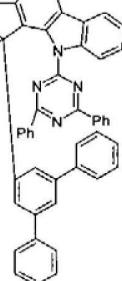
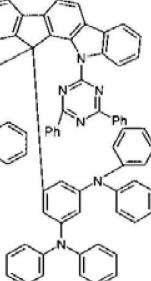
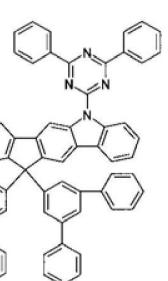
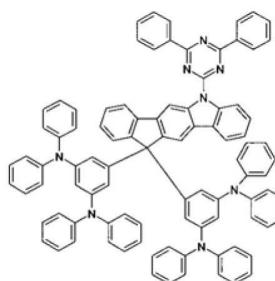


化合物 (17)



化合物 (18)

40



## 【請求項2】

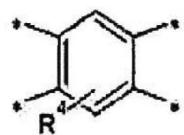
前記化学式2は、下記の化学式2aまたは2bで表される、請求項1に記載の有機光電

50

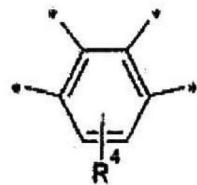
子素子用化合物：

【化4】

[化学式2a]



[化学式2b]



前記化学式2aおよび2bにおいて、

10

$R^4$ は、水素、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリールアミン基またはこれらの組み合わせである。

【請求項3】

前記化学式3aの $Q^1$ ～ $Q^5$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCRであり。

但し、 $Q^1$ ～ $Q^5$ の中で選択された1～3個はNであり、残りはそれぞれ独立してCRであり、ここで、前記Rは、水素、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであり、

20

前記化学式3aの $Q_{a1}$ 、 $Q_{a3}$ 、および $Q_{a5}$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCHであり、

$Q_{a1}$ 、 $Q_{a3}$ 、および $Q_{a5}$ の中で選択された1～3個はNであり、残りはCHである、請求項1に記載の有機光電子素子用化合物。

【請求項4】

前記化学式3のnは、0～2の整数である、請求項1に記載の有機光電子素子用化合物。

【請求項5】

前記化学式1～3において、

30

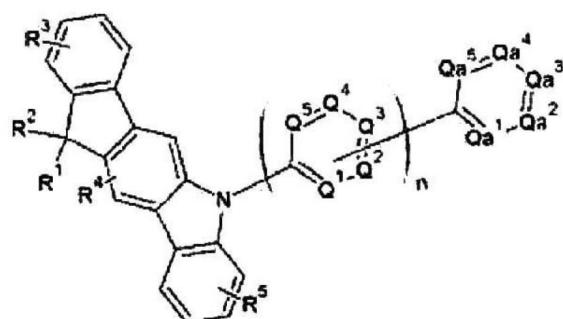
$R^3$ ～ $R^5$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、C6～C30のアリール基、またはこれらの組み合わせである、請求項1に記載の有機光電子素子用化合物。

【請求項6】

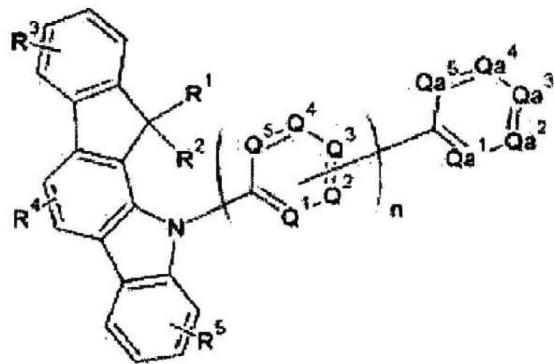
下記の化学式4～化学式9で表される、請求項1に記載の有機光電子素子用化合物：

【化5】

[化学式4]

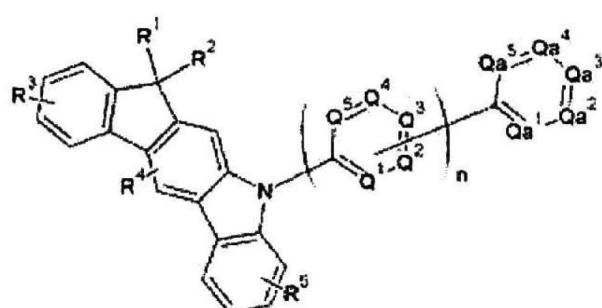


[化学式5]



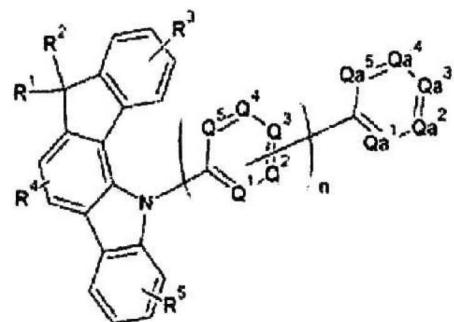
10

[化学式6]

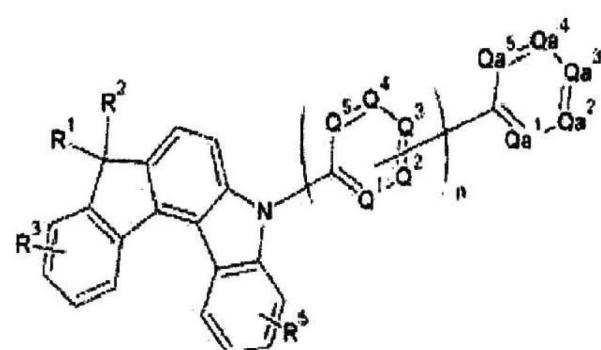


[化6]

[化学式8]

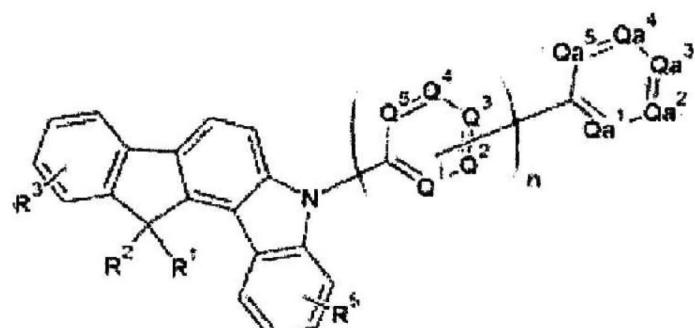


20



30

[化学式9]



40

前記化学式4～化学式9において、

Q<sup>1</sup>～Q<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはC  
Rであり、ここで、前記Rは、水素、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール

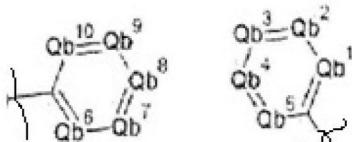
50

基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであり、

Q<sub>a</sub><sup>1</sup>、Q<sub>a</sub><sup>3</sup>、およびQ<sub>a</sub><sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCHであり、但し、Q<sub>a</sub><sup>1</sup>、Q<sub>a</sub><sup>3</sup>、およびQ<sub>a</sub><sup>5</sup>の中で選択された1個以上はNであり、

Q<sub>a</sub><sup>2</sup>およびQ<sub>a</sub><sup>4</sup>は、それぞれ下記の構造式Aおよび構造式Bであり、  
【化7】

[構造式A] [構造式B]



10

前記構造式Aおよび構造式Bにおいて、Q<sub>b</sub><sup>1</sup>～Q<sub>b</sub><sup>10</sup>は、請求項1で定義した通りである、

R<sup>1</sup>は、R<sub>a</sub><sup>1</sup>で置換されたまたは非置換のフェニル基であり、R<sup>2</sup>は、R<sub>a</sub><sup>2</sup>で置換されたまたは非置換のフェニル基であり（R<sub>a</sub><sup>1</sup>およびR<sub>a</sub><sup>2</sup>は、請求項1で定義した通りである）、

R<sup>3</sup>～R<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

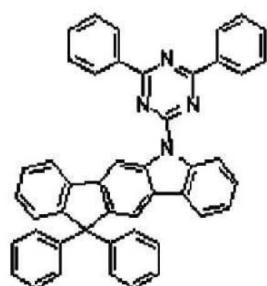
nは、0～5の整数である。

【請求項7】

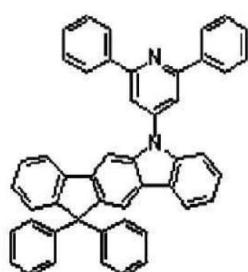
下記の化学式10～26、28～33で表される、請求項1に記載の有機光電子素子用化合物：

【化8】

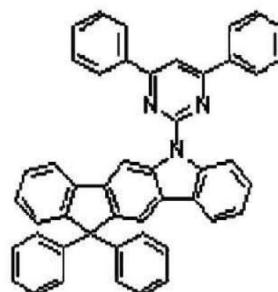
[化学式10]



[化学式11]



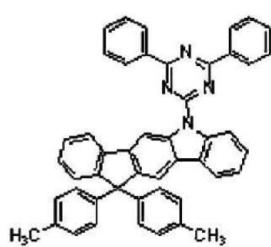
[化学式12]



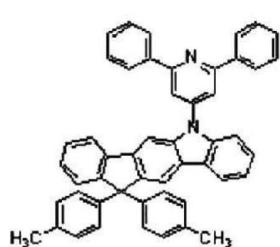
30

【化9】

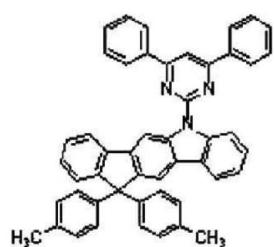
[化学式13]



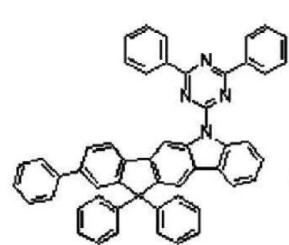
[化学式14]



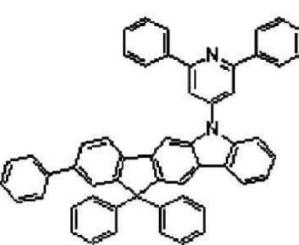
[化学式15]



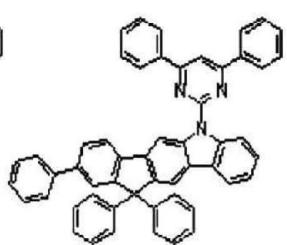
[化学式16]



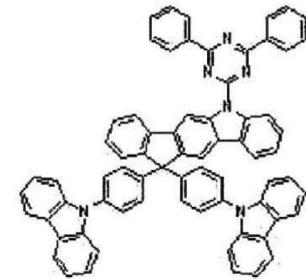
[化学式17]



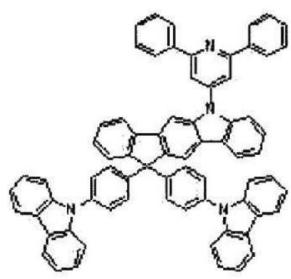
[化学式18]



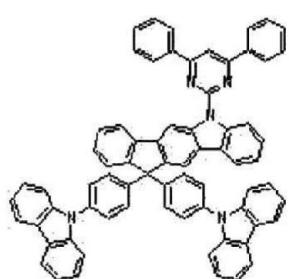
[化学式19]



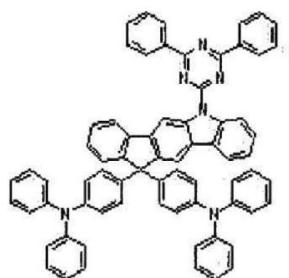
[化学式20]



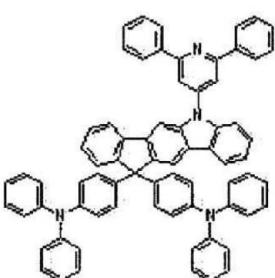
[化学式21]



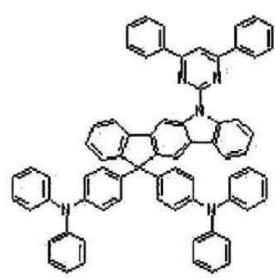
[化学式22]



[化学式23]



[化学式24]



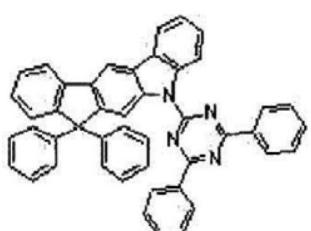
10

20

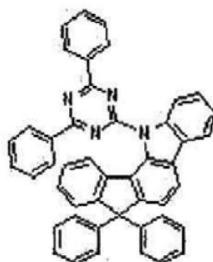
30

## 【化 1 0】

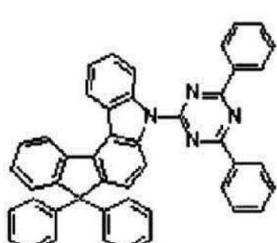
## [化学式 2 5]



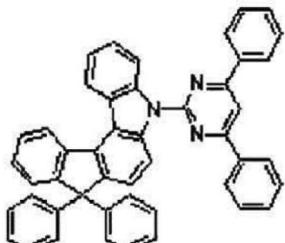
## [化学式 2 6]



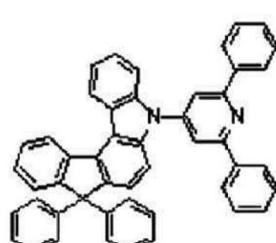
## [化学式 2 8]



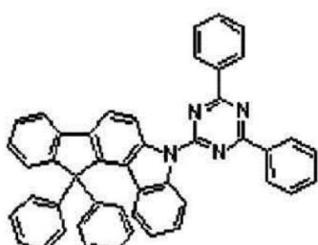
## [化学式 2 9]



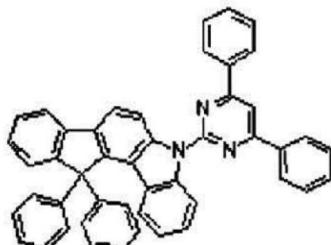
## [化学式 3 0]



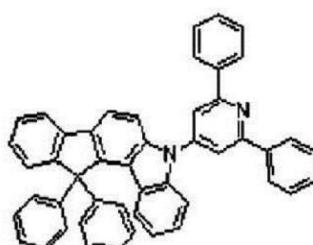
## [化学式 3 1]



## [化学式 3 2]



## [化学式 3 3]



## 【請求項 8】

電荷輸送物質またはホスト物質として使用される、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の有機光電子素子用化合物。

## 【請求項 9】

陽極；陰極；および前記陽極と陰極との間に配置された少なくとも 1 つの有機薄膜層を含み、

前記少なくとも 1 つの有機薄膜層は、請求項 1 ~ 8 のいずれか一項に記載の有機光電子素子用化合物を含む、有機発光ダイオード。

## 【請求項 10】

前記有機薄膜層は、発光層、正孔阻止層、電子阻止層、電子輸送層、電子注入層、正孔注入層、正孔輸送層またはこれらの組み合わせである、請求項 9 に記載の有機発光ダイオード。

## 【請求項 11】

請求項 9 または 10 に記載の有機発光ダイオードを含む、表示装置。

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0 0 0 1】

本記載は、有機光電子素子用化合物、それを含む有機発光ダイオード、および前記有機発光ダイオードを含む表示装置に関する。

## 【背景技術】

## 【0 0 0 2】

光電子素子 (optoelectric device) は広い意味で光エネルギーを

10

20

30

40

50

電気エネルギーに変換したり、電気エネルギーを光エネルギーに変換する素子である。前記光電子素子は、有機発光ダイオード (O L E D : O r g a n i c - L i g h t E m i t t i n g D i o d e s ) 、太陽電池、トランジスタなどを例に挙げられる。特に、有機発光ダイオードは、近年、平板ディスプレイ ( f l a t p a n e l d i s p l a y ) の需要が増加することに伴って注目されている。

【 0 0 0 3 】

有機発光ダイオードに電流を加えると、陽極と陰極からそれぞれ正孔と電子が注入され、注入された正孔と電子はそれぞれの正孔輸送層 ( H T L ) と電子輸送層 ( E T L ) へ移動し発光層で再結合して発光励起子を形成する。このように形成された発光励起子は基底状態に遷移しながら光を放出する。前記光は発光メカニズムにより一重項励起子を利用する蛍光と三重項励起子を利用する燐光とに分けられ、前記蛍光および燐光は有機発光ダイオードの発光源として使用され得る ( D . F . O ' B r i e n , A p p l . P h y s . L e t t . , 7 4 ( 3 ) , 4 4 2 , 1 9 9 9 ; M . A . B a l d o , A p p l . P h y s . L e t t . , 7 5 ( 1 ) , 4 , 1 9 9 9 ) 。

10

【 0 0 0 4 】

電子が基底状態から励起状態に遷移すると、項間交差 ( i n t e r s y s t e m c r o s s i n g ) を通じて一重項励起子が三重項励起子に非発光遷移し、前記三重項励起子は再び基底状態に遷移して光を放出する。この時の発光を燐光発光という。前記三重項励起子は基底状態に直接遷移することはできず、必ず電子スピンのフリッピング段階を経なければならない。

20

【 0 0 0 5 】

したがって、燐光発光は蛍光発光よりも半減期 ( 発光時間、寿命 ) が長いという特性を有する。

【 0 0 0 6 】

また、正孔と電子が再結合して発光励起子を形成する場合、三重項励起子は一重項励起子よりも約 3 倍多く生成される。蛍光物質は、一重項励起状態を 2 5 % 有し発光効率に限界がある。しかし、燐光は三重項励起子の発生確率 7 5 % 、および一重項励起状態である 2 5 % まで使用することができて、理論的な内部量子効率は 1 0 0 % となる。つまり、燐光発光物質は蛍光発光物質に比べて約 4 倍大きな発光効率を達成することができるという長所がある。

30

【 0 0 0 7 】

一方、有機発光ダイオードの効率と安定性を増加させるために発光層にホスト物質とドーパントを共に添加することができる。前記ホスト物質としては、 4 , 4 ' - N , N ' - ディカルバゾールビフェニル ( C B P ) が主に使用されていた。しかし、 C B P は構造的対称性が非常に高いため、結晶化し易く、熱的安定性が低いため、素子の耐熱試験中に、短絡や画素欠陥が発生する短所があった。また、 C B P のような大部分のホスト物質は正孔の移動速度が電子の移動速度よりも速いため、発光層で励起子が効率的に形成されず、素子の発光効率が減少する短所があった。

【 0 0 0 8 】

また、低分子ホスト物質は、一般に真空蒸着法を用いるため、湿式工程に比べて製造コストが高いという短所があった。また、大部分の低分子ホスト物質は有機溶媒に対する溶解度が低いため、湿式工程に適用できず優れた膜特性を有する有機薄膜層を形成できなかった。

40

【 0 0 0 9 】

したがって、効率および寿命に優れた有機光電子素子を実現するためには、電気的、熱的安定性に優れ、正孔と電子を全て良好に伝達することができるバイポーラ特性を有する燐光のホスト物質および電荷輸送物質を開発し、正孔や電子を良好に伝達することができる物質を混合して使用することができるホスト物質の開発が必要である。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

50

## 【0010】

本発明の一実施形態は、熱的安定性に優れ、正孔と電子を全て良好に伝達することができる有機光電子素子用化合物を提供する。

## 【0011】

本発明の他の一実施形態は、前記有機光電子素子用化合物を含む効率および駆動電圧特性に優れた有機発光ダイオードを提供する。

## 【0012】

本発明のさらなる他の一実施形態は、前記有機発光ダイオードを含む表示装置を提供する。

## 【課題を解決するための手段】

10

## 【0013】

本発明の一実施形態によれば、下記の化学式1～3で表される置換基が順次に結合された有機光電子素子用化合物が提供される。

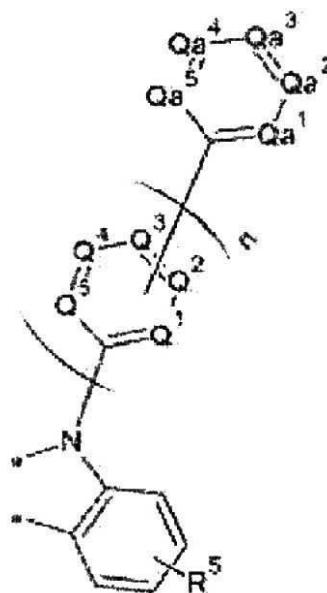
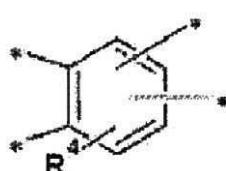
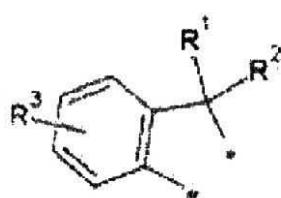
## 【0014】

## 【化1】

[化学式1]

[化学式2]

[化学式3]



## 【0015】

前記化学式1～3において、

Q<sup>1</sup>～Q<sup>5</sup>およびQa<sup>1</sup>～Qa<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCRであり、ここで、前記Rは、水素、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであり、

R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

R<sup>3</sup>～R<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>30</sub>のアルキル基、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

nは、0～5の整数である。

## 【0016】

この時、前記化学式1は、下記の化学式1aで表されうる。

30

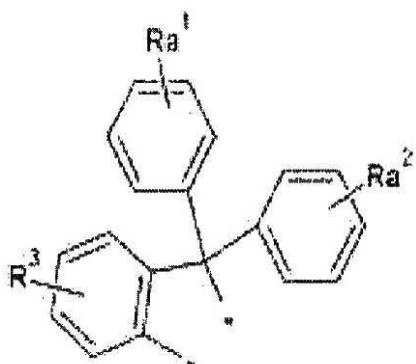
40

50

【0017】

【化2】

[化学式1a]



10

【0018】

前記化学式1aにおいて、

Ra¹およびRa²は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

20

R³は、水素、C1～C30のアルキル基、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリールアミン基またはこれらの組み合わせである。

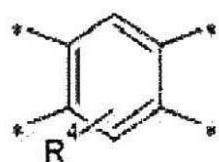
【0019】

また、前記化学式2は、下記の化学式2aまたは2bで表されうる。

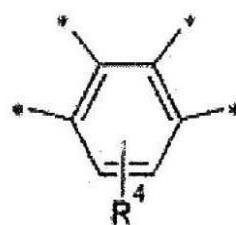
【0020】

【化3】

[化学式2a]



[化学式2b]



30

【0021】

前記化学式2aおよび2bにおいて、

R⁴は、水素、C1～C30のアルキル基、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリールアミン基またはこれらの組み合わせである。

40

【0022】

また、前記化学式3のQ¹～Q⁵およびQa¹～Qa⁵は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCRであり、但し、Q¹～Q⁵およびQa¹～Qa⁵の中で選択された1個以上はNであり、残りはそれぞれ独立してCRであり、ここで、前記Rは、水素、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであってもよく、特に、Q¹～Q⁵の中で選択された1～3個はNであり、Qa¹～Qa⁵の中で選択された1～3個はNであり、残りはそれぞれ独立してCRであり、ここで、前記Rは、水

50

素、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであってもよい。また、前記化學式3のnは、0～2の整数でありうる。

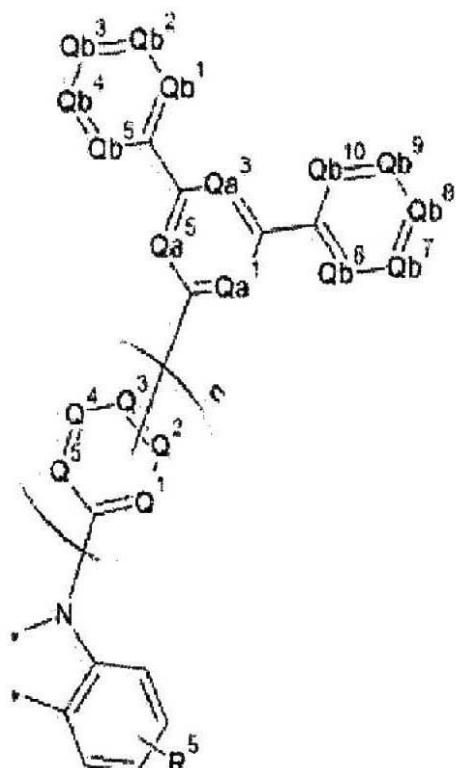
[ 0 0 2 3 ]

前記化学式3は、下記の化学式3aで表されうる。

【 0 0 2 4 】

【化 4】

### 〔化学式 3 a〕



【 0 0 2 5 】

前記化学式 3 a において、

Q a<sup>1</sup>、Q a<sup>3</sup>、およびQ a<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCHであり、但し、Q a<sup>1</sup>、Q a<sup>3</sup>、およびQ a<sup>5</sup>の中で選択された1個以上はNであり、

$Q^1 \sim Q^5$ 、および  $Qb^1 \sim Qb^{10}$  は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、N または CR であり、ここで、前記 R は、水素、置換されたまたは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub> のアリール基、置換されたまたは非置換の C<sub>3</sub> ~ C<sub>30</sub> のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであり、

$R^5$  は、水素、C 1 ~ C 30 のアルキル基、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換の C 6 ~ C 30 のアリール基、置換されたまたは非置換の C 3 ~ C 30 のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換の C 6 ~ C 30 のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

これは、0～5の整数である。

〔 0 0 2 6 〕

また、前記化学式 1 ~ 3において、R<sup>3</sup> ~ R<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、C1 ~ C30のアルキル基、C6 ~ C30のアリール基、またはこれらの組み合わせであってもよい。

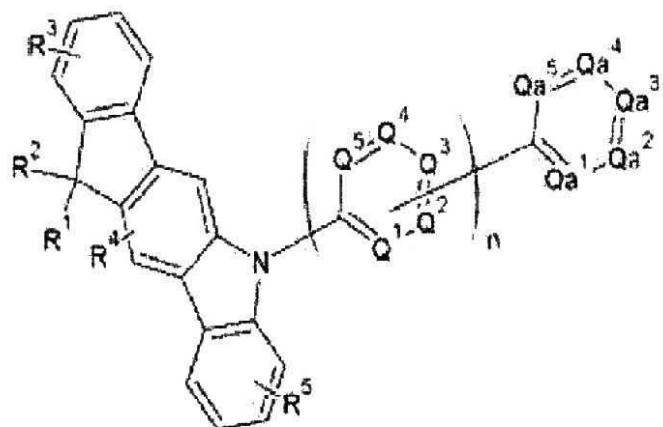
【 0 0 2 7 】

また、前記有機光電子素子用化合物は、下記の化學式 4 ~ 化學式 9 で表されうる。

【 0 0 2 8 】

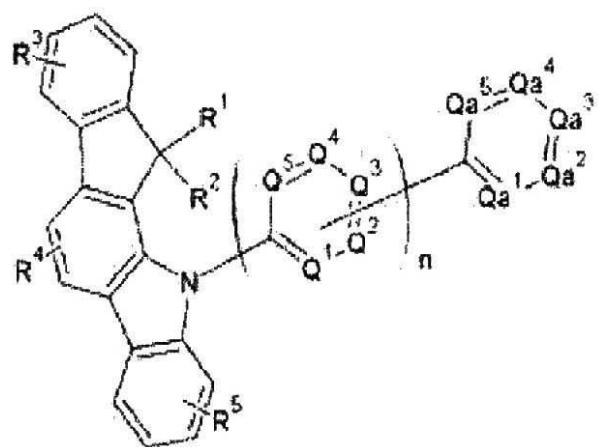
【化5】

[化学式4]



10

[化学式5]



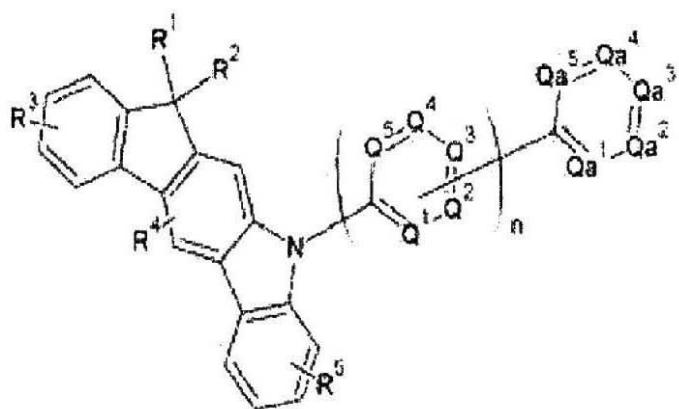
20

【0029】

30

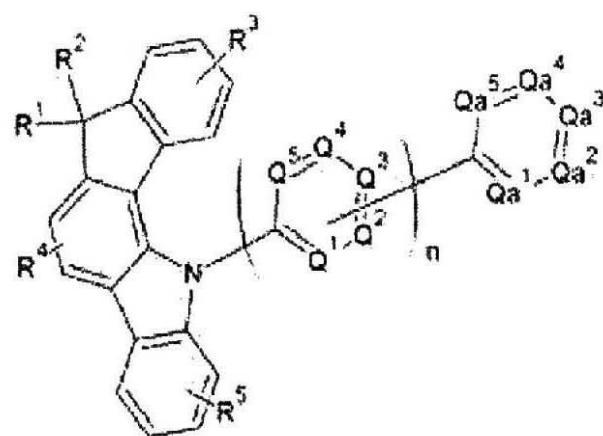
【化6】

[化学式6]



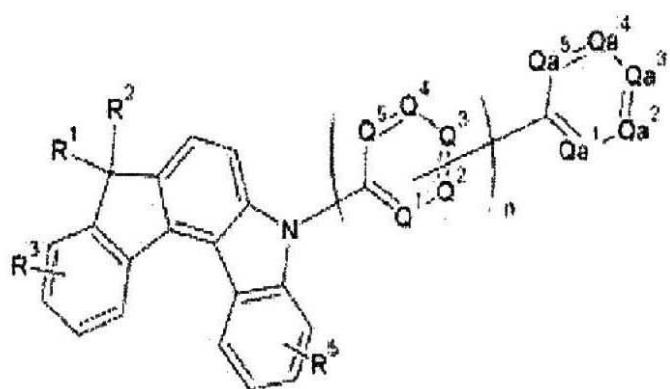
10

[化学式7]



20

[化学式8]

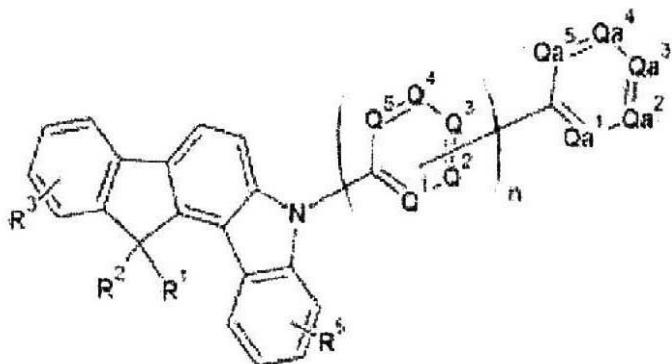


30

【0030】

【化7】

[化学式9]



10

【0031】

前記化学式4～化学式9において、

$Q^1$ ～ $Q^5$ および $Qa^1$ ～ $Qa^5$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCRであり、ここで、前記Rは、水素、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであり、

$R^1$ および $R^2$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

$R^3$ ～ $R^5$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、C1～C30のアルキル基、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

$n$ は、0～5の整数である。

【0032】

20

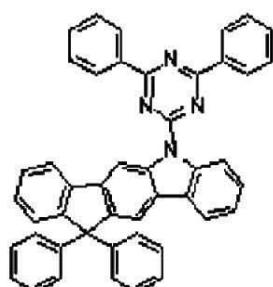
特に、前記有機光電子素子用化合物は、下記の化学式10～33で表されうる。

【0033】

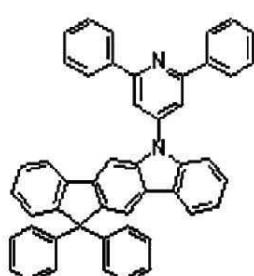
30

【化 8】

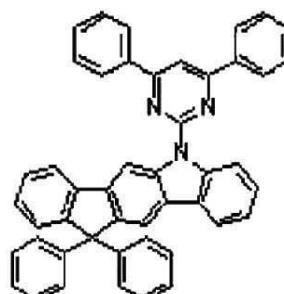
[化学式 1 0]



[化学式 1 1]

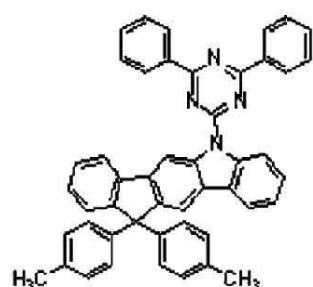


[化学式 1 2]

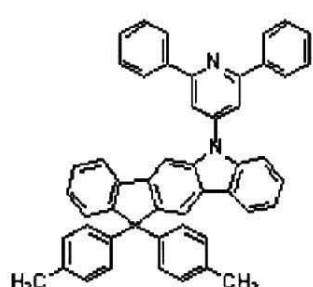


10

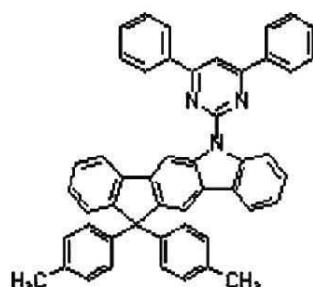
[化学式 1 3]



[化学式 1 4]

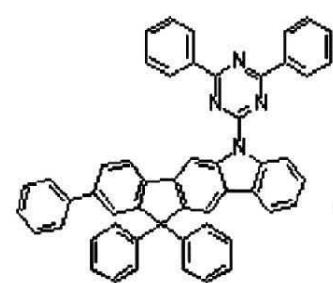


[化学式 1 5]

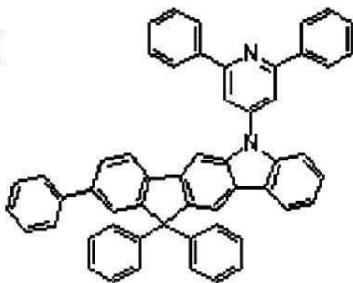


20

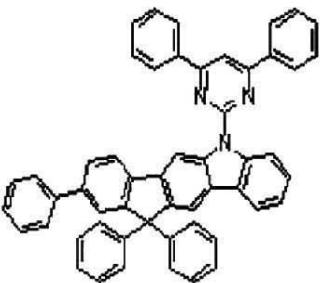
[化学式 1 6]



[化学式 1 7]



[化学式 1 8]

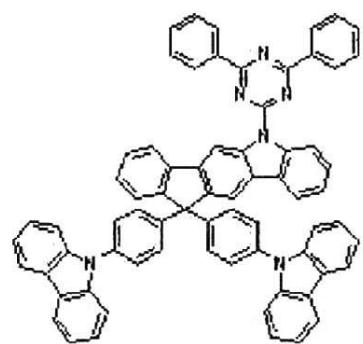


30

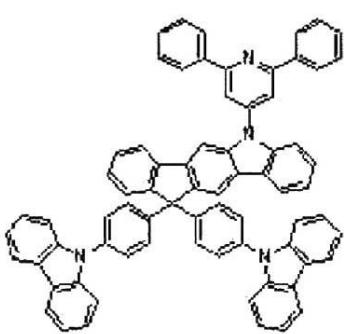
【0034】

【化9】

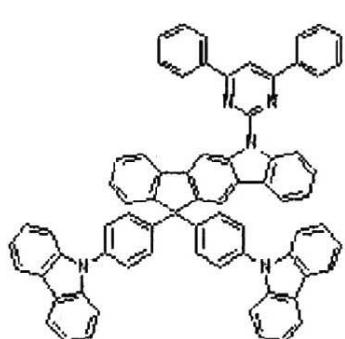
[化学式19]



[化学式20]

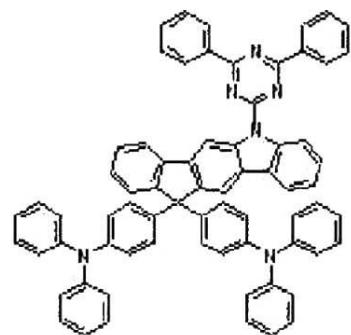


[化学式21]

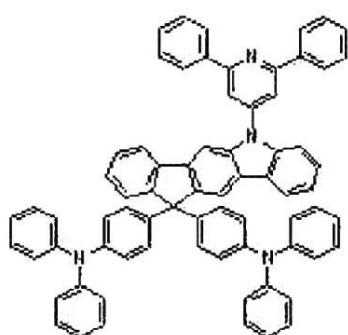


10

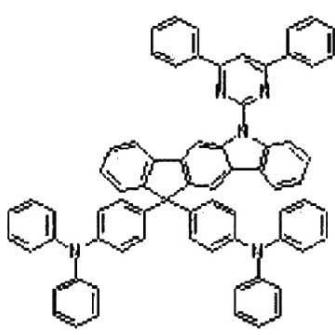
[化学式22]



[化学式23]

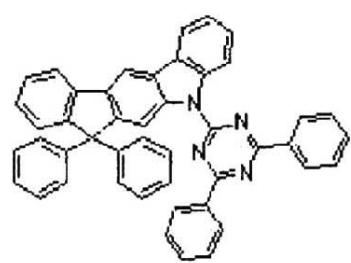


[化学式24]

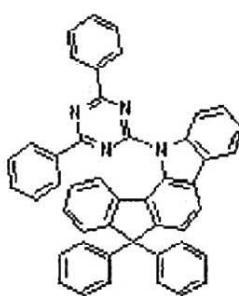


20

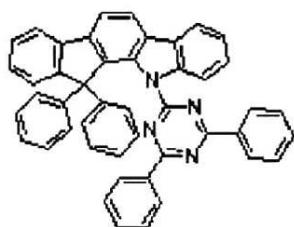
[化学式25]



[化学式26]



[化学式27]

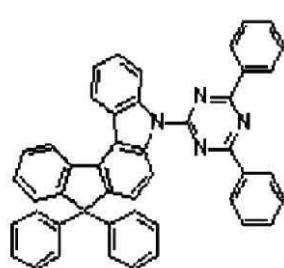


30

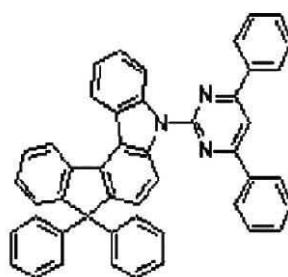
【0035】

【化 1 0】

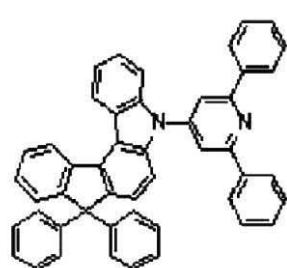
[化学式 2 8]



[化学式 2 9]

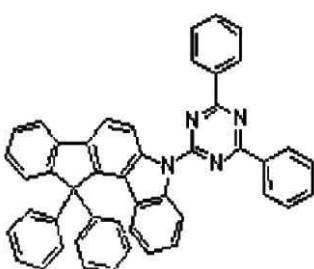


[化学式 3 0]

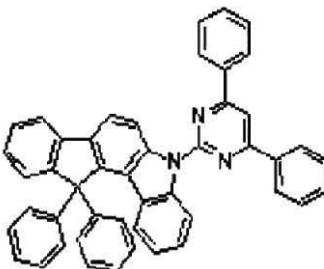


10

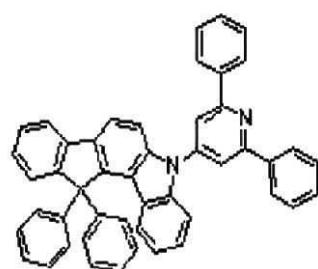
[化学式 3 1]



[化学式 3 2]



[化学式 3 3]



20

【0 0 3 6】

前記有機光電子素子用化合物は、電荷輸送物質またはホスト物質として使用されてもよし、熱分解温度( $T_d$ )は350~600であってもよい。

【0 0 3 7】

本発明の他の実施形態によれば、陽極、陰極、および前記陽極と陰極との間に配置された少なくとも1つの有機薄膜層を含み、前記有機薄膜層は、前記有機光電子素子用化合物を含む有機発光ダイオードを提供する。

【0 0 3 8】

前記有機薄膜層は、発光層、正孔阻止層、電子阻止層、電子輸送層(ETL)、電子注入層(EIL)、正孔注入層(HIL)、正孔輸送層(HTL)またはこれらの組み合わせであってもよい。

30

【0 0 3 9】

本発明のさらなる他の実施形態によれば、前記有機発光ダイオードを含む表示装置が提供される。

【0 0 4 0】

その他本発明の実施形態の具体的な事項は以下の詳細な説明に記載されている。

【発明の効果】

【0 0 4 1】

本発明の一実施形態による有機光電子素子用化合物は、優れた熱的安定性を有し、特に、有機光電子素子の有機薄膜層に使用されて低い駆動電圧でも高い発光効率を有し、寿命が改善した有機発光ダイオードおよび表示装置を提供する。

40

【図面の簡単な説明】

【0 0 4 2】

【図1】本発明の多様な実施形態による有機光電子素子用化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

【図2】本発明の多様な実施形態による有機光電子素子用化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

【図3】本発明の多様な実施形態による有機光電子素子用化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

【図4】本発明の多様な実施形態による有機光電子素子用化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

【図5】本発明の多様な実施形態による有機光電子素子用化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

50

ドを示す断面図である。

【図5】本発明の多様な実施形態による有機光電子素子用化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

【図6】実施例3および比較例1で製造された有機発光ダイオードの電圧による電流密度の変化を示すグラフである。

【図7】実施例3および比較例1で製造された有機発光ダイオードの電圧による輝度の変化を示すグラフである。

【図8】実施例3および比較例1で製造された有機発光ダイオードの輝度による電流効率の変化を示すグラフである。

【図9】実施例3および比較例1で製造された有機発光ダイオードの輝度による電力効率の変化を示すグラフである。 10

【発明を実施するための形態】

【0043】

以下、本発明の例示的な実施形態を詳しく説明する。但し、これらの実施形態は単なる例示であり、これらによって本発明が制限されるものではなく、特許請求の範囲の記載により定められる。

【0044】

本明細書で「置換された」の用語は、別途の定義がない限り、ハロゲン基、シアノ基、C1～C30のアルキル基、C3～C30のシクロアルキル基、C6～C30のアリール基、C1～C30のアルコキシ基またはこれらの組み合わせで置換されたものを意味する 20。

【0045】

本明細書で「ハロゲン基」の用語は、別途の定義がない限り、フルオロ基、クロロ基、ブロモ基またはこれらの組み合わせのハロゲン基を意味し、特に、フルオロ基を使用することが好みしい。

【0046】

本明細書で「ヘテロ」の用語は、別途の定義がない限り、1個の環内にN、O、S、またはPを1～3個含有し、残りは炭素であるものを意味する。

【0047】

本発明の一実施形態によれば、下記の化学式1～3で表される置換基が順次に結合された有機光電子素子用化合物が提供される。 30

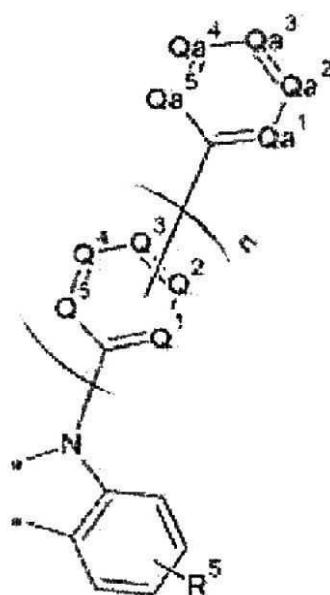
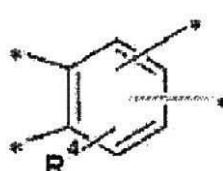
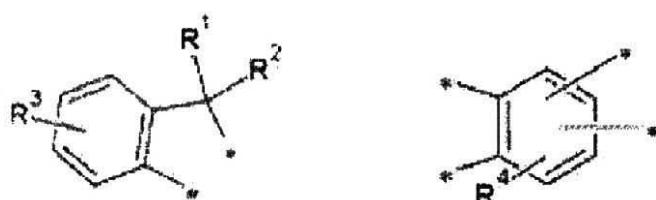
【0048】

【化11】

【化学式1】

【化学式2】

【化学式3】



10

20

30

40

50

## 【0049】

前記化学式1～3において、

$Q^1$ ～ $Q^5$ および $Qa^1$ ～ $Qa^5$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCRであり、ここで、前記Rは、水素、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであり、前記 $Q^1$ ～ $Q^5$ および $Qa^1$ ～ $Qa^5$ がそれぞれ独立してCRである場合、それぞれのRは互いに同一または異なるものであってもよい。また、前記RがC1～C30のアルキル基で置換される場合、前記化合物は有機光電子素子の有機薄膜層に適用されて有機薄膜層の成膜特性を改善することができる。

## 【0050】

10

また、前記Rが置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基である場合、前記アリール基は、フェニル基、ナフチル基、アントラセン基、フェナントレン基、テトラセン基、ピレン基、フルオレン基またはこれらの組み合わせでありうる。しかし、前記アリール基は前記例に限定されない。

## 【0051】

また、前記Rが置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基である場合、前記ヘテロアリール基は、チオフェン、フラン、ピロール、イミダゾール、チアゾール、オキサゾール、オキサジアゾ-ル、チアジアゾール、トリアゾール、トリアジン、ピリジン、ピリミジン、ピリダジン、ピラジン、キノリン、イソキノリンまたはこれらの組み合わせでありうる。しかし、前記ヘテロアリール基は前記例に限定されない。

20

## 【0052】

$R^1$ および $R^2$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

$R^3$ ～ $R^5$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、C1～C30のアルキル基、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリール基、置換されたまたは非置換のC3～C30のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC6～C30のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、nは、0～5の整数である。この時、前記nが2以上の整数である場合、それぞれの反復単位は互いに同一または異なるものであってもよい。

30

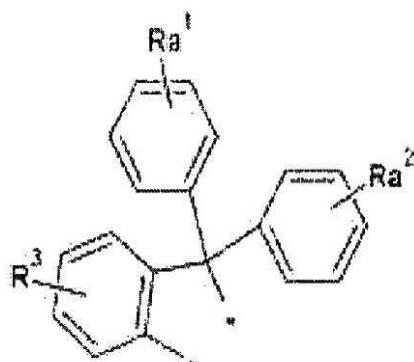
## 【0053】

この時、前記化学式1は、下記の化学式1aで表されうる。

## 【0054】

## 【化12】

## [化学式1a]



## 【0055】

前記化学式1aにおいて、

$Ra^1$ および $Ra^2$ は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水

40

50

素、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

R<sup>3</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>30</sub>のアルキル基、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリールアミン基またはこれらの組み合わせである。

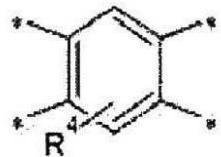
【0056】

また、前記化学式2は、下記の化学式2aまたは2bで表されうる。

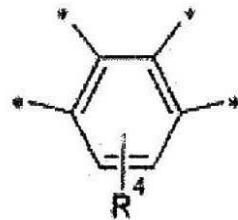
【0057】

【化13】

[化学式2a]



[化学式2b]



【0058】

前記化学式2aおよび2bにおいて、

R<sup>4</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>30</sub>のアルキル基、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリールアミン基またはこれらの組み合わせである。

【0059】

また、前記化学式3のQ<sup>1</sup>～Q<sup>5</sup>およびQa<sup>1</sup>～Qa<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCRであり、但し、Q<sup>1</sup>～Q<sup>5</sup>およびQa<sup>1</sup>～Qa<sup>5</sup>の中で選択された1個以上はNであり、残りはそれぞれ独立してCRであり、ここで、前記Rは、水素、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであってもよい。特に、Q<sup>1</sup>～Q<sup>5</sup>の中で選択された1～3個はNであり、Qa<sup>1</sup>～Qa<sup>5</sup>の中で選択された1～3個はNであり、残りはそれぞれ独立してCRであり、ここで、前記Rは、水素、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであってもよい。これによって、電子輸送基としてより好ましく機能することができる置換基を含むことができる。

【0060】

また、前記化学式3のnは、0～2の整数でありうる。

【0061】

前記化学式3は、下記の化学式3aで表されうる。

【0062】

10

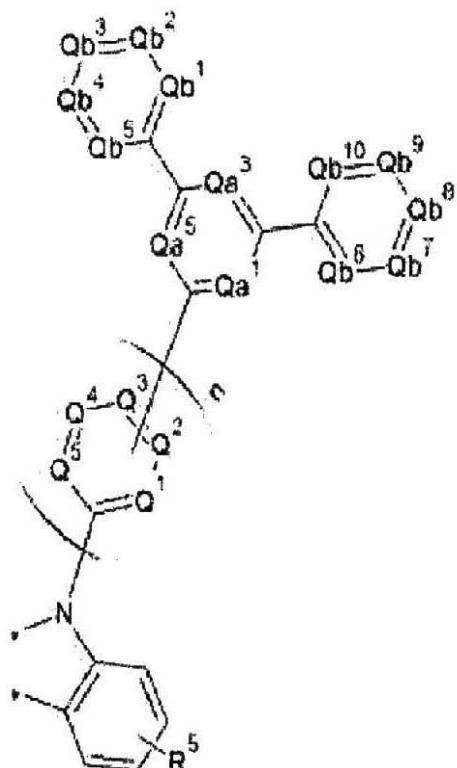
20

30

40

【化 1 4 】

[化学式 3 a]



10

20

〔 0 0 6 3 〕

前記化学式 3 a において、

Q a<sup>1</sup>、Q a<sup>3</sup>、およびQ a<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCHであり、但し、Q a 1、Q a 3、およびQ a 5の中で選択された1個以上はNであり、

$Q^1 \sim Q^5$ 、および  $Qb^1 \sim Qb^{10}$  は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、N または CR であり、ここで、前記 R は、水素、置換されたまたは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub> のアリール基、置換されたまたは非置換の C<sub>3</sub> ~ C<sub>30</sub> のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであり、

$R^5$  は、水素、C 1 ~ C 30 のアルキル基、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換の C 6 ~ C 30 のアリール基、置換されたまたは非置換の C 3 ~ C 30 のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換の C 6 ~ C 30 のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

これは、0 ~ 5 の整数である。

( 0 0 6 4 )

また、前記化学式 1 ~ 3 において、R<sup>3</sup> ~ R<sup>5</sup> は、互いに同一または異なるものであつて、それぞれ独立して、水素、C<sub>1</sub> ~ C<sub>30</sub> のアルキル基、C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub> のアリール基、またはこれらの組み合わせであつてもよい。

40

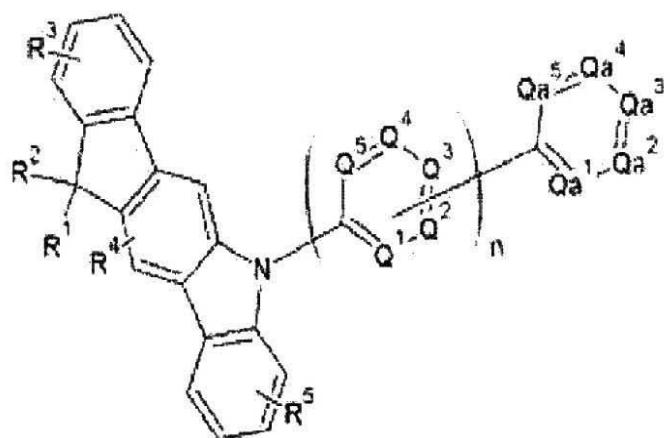
( 0 0 6 5 )

また、前記有機光電子素子用化合物は、下記の化学式4～化学式9で表されうる。

[ 0 0 6 6 ]

【化15】

[化学式4]

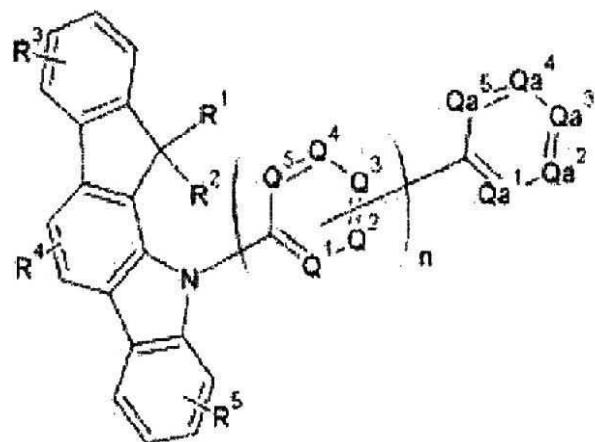


10

【0067】

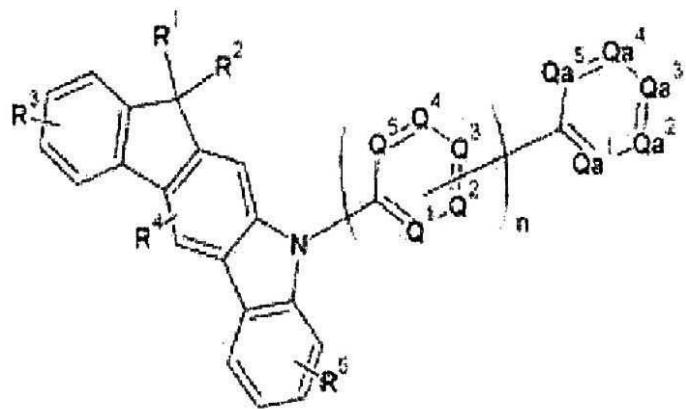
【化 1 6】

[化学式 5]



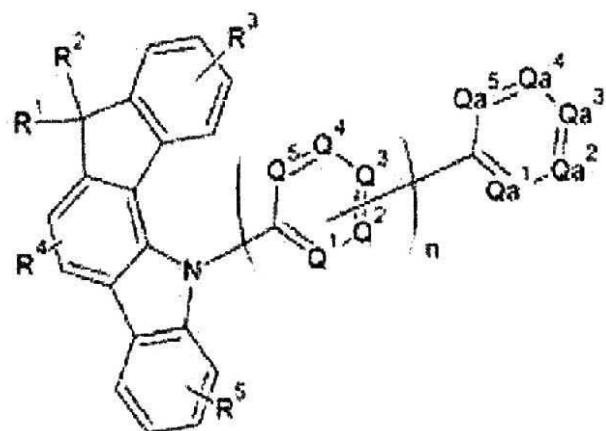
10

[化学式 6]



20

[化学式 7]



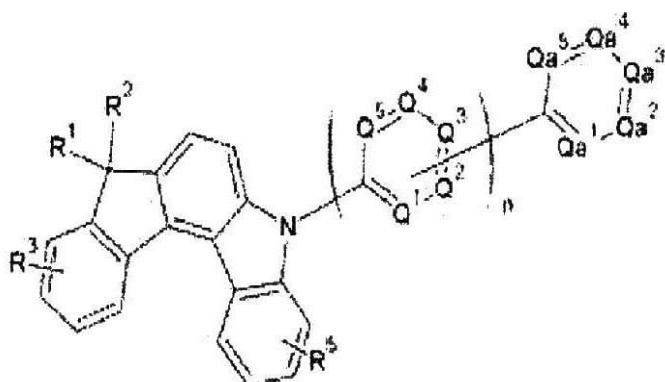
30

40

【0068】

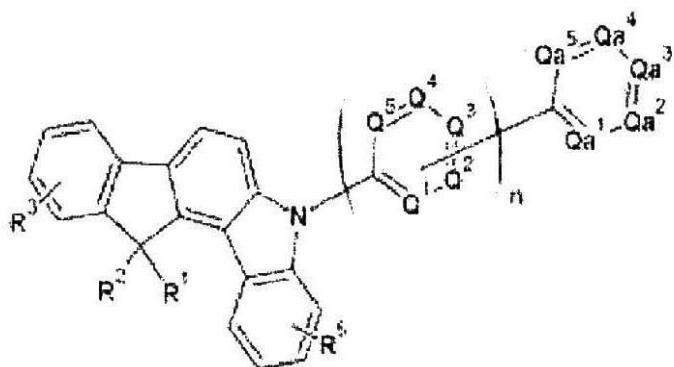
【化17】

[化学式8]



10

[化学式9]



20

【0069】

前記化学式4～化学式9において、

Q<sup>1</sup>～Q<sup>5</sup>およびQa<sup>1</sup>～Qa<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、NまたはCRであり、ここで、前記Rは、水素、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基またはこれらの組み合わせであり、

R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

R<sup>3</sup>～R<sup>5</sup>は、互いに同一または異なるものであって、それぞれ独立して、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>30</sub>のアルキル基、置換されたまたは非置換のカルバゾリル基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>3</sub>～C<sub>30</sub>のヘテロアリール基、置換されたまたは非置換のC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>のアリールアミン基またはこれらの組み合わせであり、

nは、0～5の整数である。

【0070】

特に、前記有機光電子素子用化合物は、下記の化学式10～33で表されうる。但し、本発明の一実施形態による有機光電子素子用化合物は前記化合物に限定されない。

【0071】

前記有機光電子素子用化合物は、電荷輸送物質またはホスト物質として使用されてもよく、特に、前記有機光電子素子用化合物がホスト物質として使用される場合には、前記化合物は燐光のホスト物質で、有機光電子素子の駆動電圧を下げ、発光効率を改善することができる。

【0072】

40

50

また、前記有機光電子素子用化合物がホスト物質として使用される場合、前記有機光電子素子用化合物は当該分野で一般に使用される低分子ホスト物質または高分子ホスト物質と共に混合またはブレンドして使用してもよい。また、場合によってはポリビニルカルバゾール、ポリカーボネート、ポリエステル、ポリアリレート、ポリスチレン、アクリル高分子、メタクリル高分子、ポリブチラール、ポリビニルアセタール、フタル酸ジアリル高分子、フェノール樹脂、エポキシ樹脂、シリコン樹脂、ポリスルホン樹脂、またはウレア樹脂などのバインダー樹脂を混合して使用してもよい。

## 【0073】

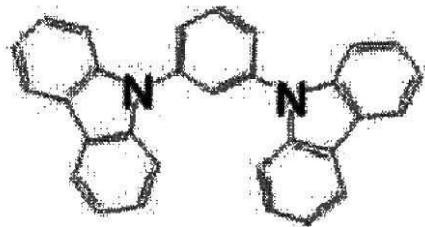
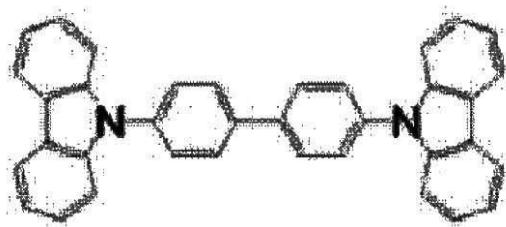
例えは、前記低分子ホスト物質としては、下記の化学式34～37で表される化合物を使用してもよく、高分子ホスト物質としては、フルオレン系高分子、ポリフェニレンビニレン系高分子、ポリパラフェニレン系高分子などの共役二重結合を有する高分子を使用してもよい。しかし、前記低分子ホスト物質および高分子ホスト物質は前記例に限定されない。

## 【0074】

## 【化18】

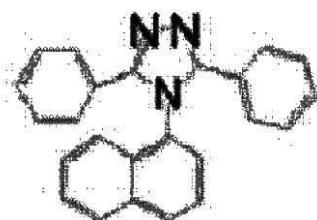
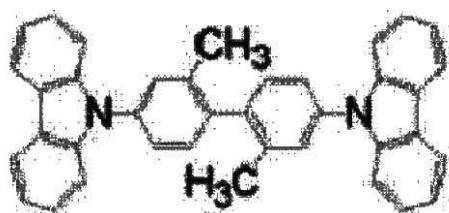
## 【化学式34】

## 【化学式35】



## 【化学式36】

## 【化学式37】



## 【0075】

また、前記有機光電子素子用化合物がホスト物質として使用される場合、前記有機光電子素子用化合物は、単独で使用してもよく、ドーパントと共に使用してもよい。前記ドーパントは、それ自体で発光能力の高い化合物であって、通常、ホストに微量混合して使用されるため、これをゲストともいう。つまり、ドーパントはホスト物質にドーピングされて発光を起こす物質であって、一般に三重項状態以上に励起させる多重項励起によって発光する金属錯体のような物質が使用される。このようなドーパントとしては当該分野で一般に使用される赤色(R)、緑色(G)、青色(B)、白色(W)の蛍光または燐光ドーパントが使用可能であるが、特に、赤色、緑色、青色または白色の燐光ドーパントを使用することが好ましい。また、発光効率が高く、凝集が容易に行われず、ホスト物質中に均一に分布されるものを使用してもよい。

## 【0076】

前記燐光ドーパントの例としては、Ir、Pt、Os、Ti、Zr、Hf、Eu、Tb、Tm、Fe、Co、Ni、Ru、Rh、Pd、またはこれらの組み合わせである元素を含む有機金属化合物が挙げられる。より具体的に、赤色燐光ドーパントとしては、白金-オクタエチルポルフィリン錯体(PtOEP)、Ir(btP)<sub>2</sub>(acac) (ビス(2-(2'-ベンゾチエニル)-ピリジナト-N, C3')イリジウム(アセチルアセト

10

20

30

40

50

ネット) )、Ir(Piq)<sub>2</sub>(acac)、Ir(Piq)<sub>3</sub>、UDC社のRD61などを使用してもよく、緑色熒光ドーパントとしては、Ir(PPy)<sub>2</sub>(acac)、Ir(PPy)<sub>3</sub>、UDC社のGD48などを使用してもよく、青色熒光ドーパントとしては、(4,6-F<sub>2</sub>PPy)<sub>2</sub>Irpic、f1rpic(イリジウム ビス[4,6-ジ-フルオロフェニル]-ピリジナト-N,C2')ピコリネート)などを使用してもよい。この時、前記Piqは、1-フェニルイソキノリンを意味し、acacは、アセチルアセトネートを意味し、PPyは、2-フェニルピリジンを意味する。

#### 【0077】

また、前記本発明の一実施形態による有機光電子素子用化合物は、熱分解温度( $T_d$ )が350~600であってもよい。これによって、本発明の一実施形態による有機光電子素子用化合物は、熱的安定性に優れたホスト物質または電荷輸送物質として使用され得る。したがって、有機光電子素子の寿命特性を向上させることができる。

10

#### 【0078】

本発明の他の実施形態によれば、陽極、陰極、および前記陽極と陰極との間に配置された有機薄膜層を含み、前記有機薄膜層は、本発明の一実施形態による有機光電子素子用化合物を含む有機光電子素子が提供される。この時、前記有機光電子素子は、有機発光ダイオード、有機太陽電池、有機トランジスタ、有機感光体ドラム、有機メモリ素子などが挙げられる。有機太陽電池の場合には、本発明の一実施形態による有機光電子素子用化合物が電極や電極バッファー層に含まれ、これによって量子効率を改善させることができ、有機トランジスタの場合には、ゲート、ソース-ドレイン電極などで電極物質として使用され得る。

20

#### 【0079】

前記有機光電子素子用化合物を含むことができる有機薄膜層としては、発光層、正孔阻止層、電子阻止層、電子輸送層(ETL)、電子注入層(EIL)、正孔注入層(HIL)、正孔輸送層(HTL)またはこれらの組み合わせであってもよい。

#### 【0080】

以下、有機発光ダイオードについて具体的に説明する。

#### 【0081】

図1~図5は、前記有機光電子素子用化合物を含む有機発光ダイオードの断面図である。

30

#### 【0082】

図1~図5を参照すれば、有機発光ダイオード100、200、300、400、および500は、陽極120と陰極110との間に配置された少なくとも1層の有機薄膜層105を含む構造を有する。

#### 【0083】

有機発光ダイオードで使用される基板としては、当該分野において特に限定されないが、より具体的に、透明性、表面平滑性、取り扱いの容易性、および防水性に優れたガラス基板、透明プラスチック基板などの基板を使用することができる。

#### 【0084】

前記陽極120は、有機薄膜層へ正孔注入を円滑にするように仕事関数が大きい物質を含む。前記陽極物質の具体的な例としては、ニッケル、白金、バナジウム、クロム、銅、亜鉛、金などのような金属またはこれら金属の合金；酸化亜鉛、酸化インジウム、インジウムスズ酸化物(ITO)、インジウム亜鉛酸化物(IZO)などのような金属酸化物；ZnO/Al、SnO<sub>2</sub>/Sbなどのような金属酸化物と複合金属を使用することができる。但し、陽極は前記物質に限定されない。前記陽極は、より具体的に、ITOを含む透明電極を使用してもよい。

40

#### 【0085】

前記陰極110は、有機薄膜層へ電子注入を円滑にするように仕事関数が小さい物質を含む。前記陰極物質の具体的な例としては、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタン、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、

50

銀、スズ、鉛、セシウム、バリウムなどのような金属またはこれらの合金；LiF/Al、LiO<sub>2</sub>/Al、LiF/Ca、LiF/Al、BaF<sub>2</sub>/Caなどのような多層構造物質などが挙げられる。但し、陰極は前記物質に限定されない。前記陰極は、より具体的に、アルミニウムなどのような金属電極を使用してもよい。

【0086】

まず、図1は、有機薄膜層105として発光層130のみが存在する有機発光ダイオード100を示した図面である。

【0087】

図2は、有機薄膜層105として電子輸送層(ETL)を含む発光層230と正孔輸送層(HTL)140が存在する2層型有機発光ダイオード200を示した図面である。この場合、発光層130は電子輸送層(ETL)の機能を果たし、正孔輸送層(HTL)140はITOのような透明電極との結合性および正孔輸送性を向上させる機能を果たす。

【0088】

前記正孔輸送層(HTL)140は、当該分野で一般に使用されるものであって、その種類を特に限定しないが、例えば、ポリ(スチレンスルホン酸塩)(PSS)層でドーピングされたポリ(3,4-エチレンジオキシ-チオフェン)(PEDOT)(PEDOT:PSS)、N,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ジフェニル-[1,1'-ビフェニル]-4,4'-ジアミン(TPD)、N,N'-ジ(1-ナフチル)-N,N'-ジフェニルベンジン(NPB)などを本発明の一実施形態による有機光電子素子用化合物と共に使用することができる。但し、正孔輸送物質は前記物質に限定されない。

【0089】

図3は、有機薄膜層105として電子輸送層(ETL)150、発光層130、および正孔輸送層(HTL)140が存在する3層型有機発光ダイオード300を示した図面であり、前記発光層130は独立した形態となっており、電子輸送性や正孔輸送性に優れた膜を別途の層で積層した形態を示している。

【0090】

前記電子輸送層(ETL)150は、当該分野で一般に使用されるものであって、特に限定されないが、例えば、アルミニウムトリス(8-ヒドロキシキノリン)(Alq<sub>3</sub>)；2-(4-ビフェニル-5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール(PBD)のような1,3,4-オキサジアゾール誘導体；1,3,4-トリス[(3-フェニル-6-トリフルオロメチル)キノキサリン-2-イル]ベンゼン(TPQ)のようなキノキサリン誘導体；およびトリアゾール誘導体などを本発明の一実施形態による有機光電子素子用化合物と共に使用してもよい。但し、電子輸送物質は前記物質に限定されない。

【0091】

図4は、有機薄膜層105として電子注入層(EIL)160、発光層130、正孔輸送層(HTL)140、および正孔注入層(HIL)170が存在する4層型有機発光ダイオード400を示した図面であり、前記正孔注入層(HIL)170は陰極として使用されるITOとの結合性を向上させることができる。

【0092】

図5は、有機薄膜層105として電子輸送層(ETL)150、発光層130、正孔輸送層(HTL)140、および正孔注入層(HIL)170にさらに電子注入層(EIL)160が存在する5層型有機発光ダイオード500を示した図面であり、前記有機発光ダイオード500は低電圧化に効果的である。

【0093】

前記発光層130、230の厚さは、5～1000nmであってもよく、前記正孔輸送層(HTL)140、および電子輸送層(ETL)150の厚さは、それぞれ独立して、10～10,000であってもよい。しかし、前記厚さ範囲に限定されない。

【0094】

前記図1～図5において前記有機薄膜層105をなす電子輸送層(ETL)150、電子注入層(EIL)160、発光層130、230、正孔輸送層(HTL)140、正孔

10

20

30

40

50

注入層( H I L ) 170 またはこれらの組み合わせには本発明の一実施形態による有機光電子素子用化合物が含まれてもよい。この時、前記有機光電子素子用化合物は、電子輸送層( E T L ) 150 または電子注入層( E I L ) 160 を含む電子輸送層( E T L ) 150 に使用されてもよく、その中でも電子輸送層( E T L ) に含まれる場合、正孔阻止層を別途に形成する必要がないため、より単純化した構造の有機発光ダイオードを提供することができる。

【0095】

また、前記有機光電子素子用化合物が発光層 130、230 内に含まれる場合、前記有機光電子素子用化合物は燐光ホストとして使用され得、前記発光層 130、230 はドーパントをさらに含むことができる。この時、前記ドーパントは、赤色、緑色、青色、または白色の燐光ドーパントであってもよい。

10

【0096】

前述した有機発光ダイオードは、基板に陽極を形成した後、真空蒸着法、スパッタリング、プラズマメッキ、イオンメッキなどの乾式成膜法；スピンコーティング、浸漬法、流動コーティング法などの湿式成膜法などで有機薄膜層を形成した後、その上に陰極を形成して製造してもよい。

【0097】

本発明のさらなる他の一実施形態によれば、前記有機発光ダイオードを含む表示装置が提供される。

20

【実施例】

【0098】

以下の実施を用いて本発明をより詳細に説明する。但し、これらの実施例は例示的な実施形態であって、本発明は制限されない。

【0099】

(有機光電子素子用化合物の合成)

実施例 1

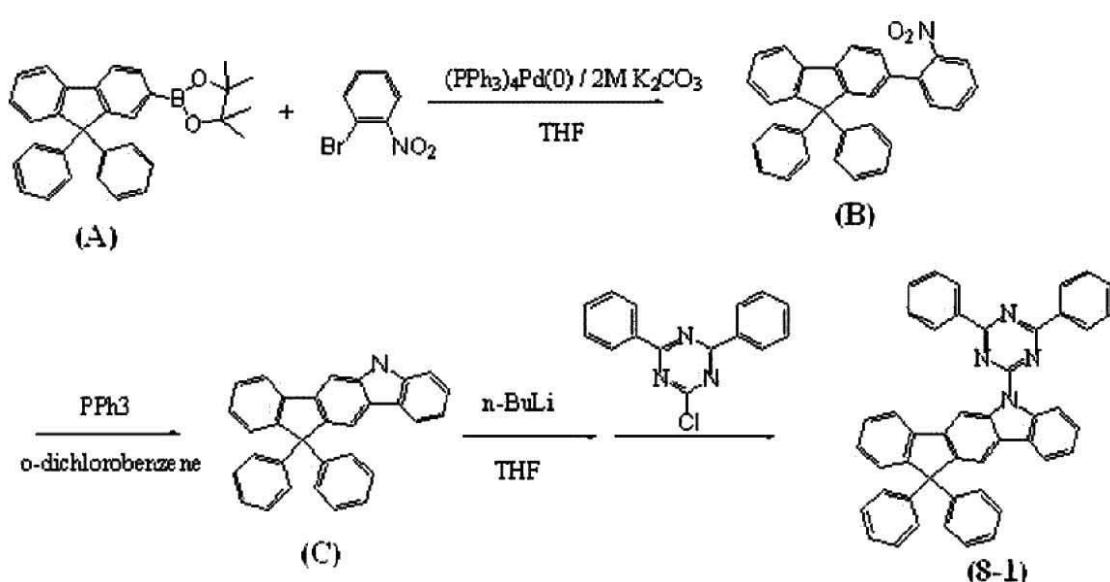
有機光電子素子用化合物を、下記の反応式 1 の方法で合成した。

【0100】

【化19】

【反応式 1】

30



40

【0101】

第1段階：中間体生成物( B )の合成

アルゴン雰囲気で温度計、還流コンデンサ、および攪拌機付き 500 mL の丸底フラスコに化合物 A 11.0 g ( 24.7 mmol )、1-ブロモ-2-ニトロベンゼン 6.0

50

g ( 2 9 . 7 mmol ) 、およびテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 1 g ( 0 . 8 6 mmol ) を 2 0 0 mL のテトラヒドロフランに溶解し、前記混合溶液に 2 M の炭酸カリウム 5 0 mL を入れた後、75 で 2 4 時間攪拌した。

【 0 1 0 2 】

室温に冷却して前記反応物の反応を終結した後、塩化メチレンで抽出し、水で洗浄した。その後、無水硫酸マグネシウムで反応物の水分を除去し、ろ過することによって有機溶媒を除去した。最終残留物を塩化メチレンとヘキサンとの混合溶媒 ( 体積比 1 : 1 ) を使用するシリカゲルクロマトグラフィーで精製して中間体生成物 ( B ) を 9 g ( 収率 : 82 . 7 % ) 得た。

【 0 1 0 3 】

第 2 段階：中間体生成物 ( C ) の合成

前記第 1 段階で合成された中間体生成物 ( B ) 8 g ( 1 8 . 2 mmol ) およびトリフェニルホスフィン 1 4 . 3 g ( 5 4 . 6 mmol ) をジクロロベンゼン 1 5 0 mL に溶解し、アルゴン雰囲気下、160 で加熱還流した。

【 0 1 0 4 】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、塩化メチレンで抽出し、水で洗浄した。その後、洗浄した反応物を無水硫酸マグネシウムで反応物の水分を除去し、ろ過することによって有機溶媒を除去した。最終残留物を塩化メチレンとヘキサンとの混合溶媒 ( 体積比 2 : 1 ) を使用するシリカゲルクロマトグラフィーで精製して中間体生成物 ( C ) を 5 . 3 g ( 収率 : 71 . 5 % ) 得た。

【 0 1 0 5 】

第 3 段階：有機光電子素子用化合物の合成

前記第 2 段階で合成された中間体生成物 ( C ) 5 g ( 1 2 . 2 mmol ) を無水テトラヒドロフラン 1 0 0 mL に溶かした後、-78 で 1 . 6 M の n - Bu Li 9 . 2 mL を徐々に滴下して 3 0 分間攪拌した。次に、室温で 2 0 分間さらに攪拌し、再び -78 で 2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニルトリアジン 3 . 5 9 g ( 1 3 . 4 mmol ) と混合して室温で 1 2 時間攪拌した。

【 0 1 0 6 】

室温に冷却して前記反応物の反応を終結した後、塩化メチレンで抽出し、水で洗浄した。その後、無水硫酸マグネシウムで反応物の水分を除去し、ろ過することによって有機溶媒を除去した。最終残留物を塩化メチレンとヘキサンとの混合溶媒 ( 体積比 1 : 3 ) を使用するシリカゲルクロマトグラフィーで精製し、再結晶して有機光電子素子用化合物 4 g ( 収率 : 51 . 3 % ) を得た。

【 0 1 0 7 】

前記得られた有機光電子素子用化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【 0 1 0 8 】

計算値 C , 8 6 . 4 9 ; H , 4 . 7 3 , N , 8 . 7 7

実測値 C , 8 6 . 5 0 ; H , 4 . 7 2 , N , 8 . 7 7

実施例 2

有機光電子素子用化合物は、下記の反応式 2 の方法で合成された。

【 0 1 0 9 】

10

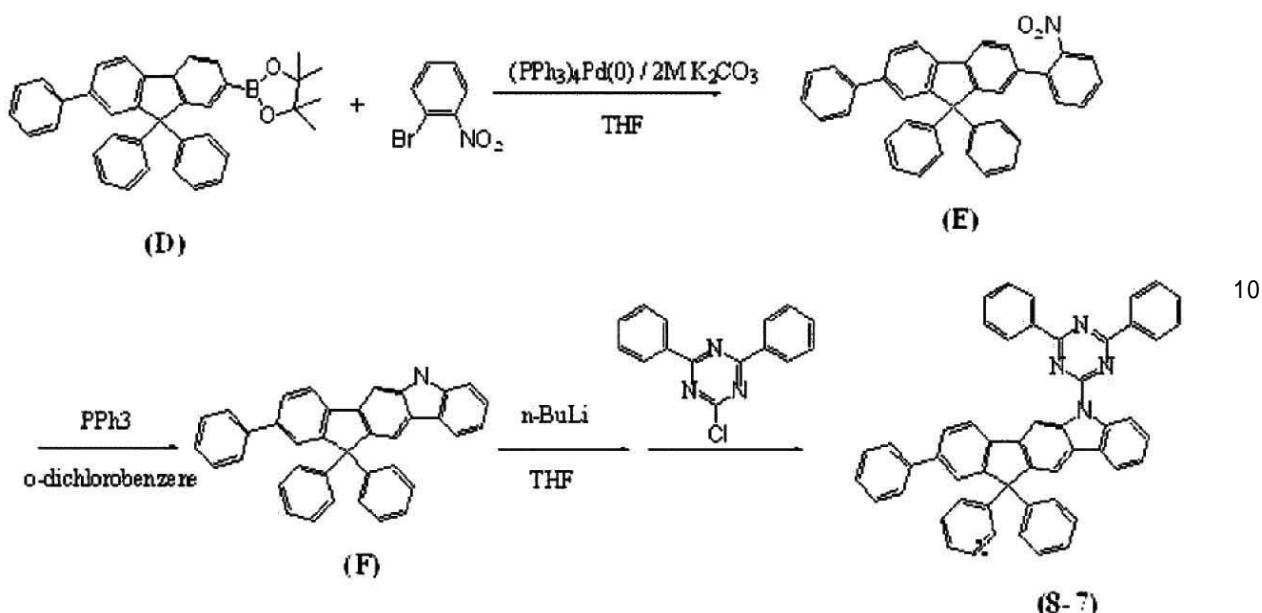
20

30

40

## 【化20】

## [反応式2]



## 【0110】

## 第1段階：中間体生成物（E）の合成

アルゴン雰囲気で温度計、還流コンデンサ、および攪拌機付き 500 mL の丸底フラスコに化合物 D 10.0 g (19.2 mmol)、1-プロモ-2-ニトロベンゼン 4.7 g (23.2 mmol)、およびテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 0.8 g (0.69 mmol) を 200 mL のテトラヒドロフランに溶解し、前記混合溶液に 20 % 濃度のテトラトリエチルアンモニウムヒドロキシド 50 mL を加えた後、75 °C で 24 時間攪拌した。

20

## 【0111】

室温に冷却して前記反応物の反応を終結した後、塩化メチレンで抽出し、水で洗浄した。その後、無水硫酸マグネシウムで反応物の水分を除去し、ろ過することによって有機溶媒を除去した。最終残留物を塩化メチレンとヘキサンとの混合溶媒（体積比 1:1）を使用するシリカゲルクロマトグラフィーで精製して中間体生成物（E）を 7 g（収率：72 %）得た。

30

## 【0112】

## 第2段階：中間体生成物（F）の合成

前記第1段階で合成された中間体生成物（E）7 g (13.5 mmol) およびトリフェニルホスフィン 10.6 g (40.7 mmol) をジクロロベンゼン 150 mL に溶解し、アルゴン雰囲気下、160 °C で加熱還流した。

30

## 【0113】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、塩化メチレンで抽出し、水で洗浄した。その後、洗浄した反応物を無水硫酸マグネシウムで反応物の水分を除去し、ろ過することによって有機溶媒を除去した。最終残留物を塩化メチレンとヘキサンとの混合溶媒（体積比 2:1）を使用するシリカゲルクロマトグラフィーで精製して中間体生成物（F）を 4.3 g（収率：65.9 %）得た。

40

## 【0114】

## 第3段階：有機光電子素子用化合物の合成

前記第2段階で合成された中間体生成物（F）4 g (8.27 mmol) を無水テトラヒドロフラン 100 mL に溶かした後、-78 °C の温度で 1.6 M の n-BuLi 6.2 mL を徐々に滴下して 30 分間攪拌した。次に、室温で 20 分間さらに攪拌し、再び -78 °C の温度で 2-クロロ-4,6-ジフェニルトリアジン 2.43 g (9.09 mmol) と混合して室温で 12 時間攪拌した。

50

## 【0115】

室温に冷却して前記反応物の反応を終結した後、塩化メチレンで抽出し、水で洗浄した。その後、無水硫酸マグネシウムで反応物の水分を除去し、ろ過することによって有機溶媒を除去した。最終残留物を塩化メチレンとヘキサンとの混合溶媒（体積比1:3）を使用するシリカゲルクロマトグラフィーで精製し、再結晶して有機光電子素子用化合物3.2g（収率：54.1%）を得た。

## 【0116】

前記得られた有機光電子素子用化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

## 【0117】

計算値 C, 86.37; H, 4.79, N, 7.84

10

実測値 C, 86.36; H, 4.80, N, 7.84

（有機発光ダイオードの製造）

実施例3

前記実施例1で合成された化合物をホストとして使用し、Ir(PPh<sub>3</sub>)<sub>3</sub>をドーパントとして使用して有機発光ダイオードを製作した。陽極としてITOを1000の厚さで使用し、陰極としてアルミニウム(Al)を1500の厚さで使用した。

## 【0118】

具体的に、有機発光ダイオードの製造方法を説明すれば、陽極は15/cm<sup>2</sup>の面抵抗値を有するITOガラス基板を50mm×50mm×0.7mmの大きさに切断し、アセトンとイソプロピルアルコールと純水との中で各15分間超音波洗浄した後、30分間UVオゾン洗浄して製造した。

20

## 【0119】

前記基板上部に真空度650×10<sup>-7</sup>Pa、蒸着速度0.1~0.3nm/sの条件下N,N'-ジ(1-ナフチル)-N,N'-ジフェニルベンジン(NPB)(70nm)および4,4',4''-トリ(N-カルバゾリル)トリフェニルアミン(TCTA)(10nm)を蒸着して800の正孔輸送層(HTL)を形成した。

## 【0120】

次に、同様の真空蒸着条件で前記実施例1で合成された化合物を利用して膜厚300の発光層を形成し、この時、燐光ドーパントであるIr(PPh<sub>3</sub>)<sub>3</sub>を同時に蒸着した。この時、燐光ドーパントの蒸着速度を調節し、発光層の全重量を100重量%とした時、燐光ドーパントが合計7重量%になるように蒸着した。

30

## 【0121】

前記発光層上部に同様の真空蒸着条件を利用してアルミニウム(III)ビス(2-メチル-8-キノリナト)4-フェニルフェノラート(BAlq)を蒸着して膜厚50の正孔阻止層を形成した。

## 【0122】

次に、同様の真空蒸着条件でAlq<sub>3</sub>を蒸着し、膜厚200の電子輸送層(ETL)を形成した。

## 【0123】

前記電子輸送層(ETL)上部に陰極としてLiFとAlを順次に蒸着して有機発光ダイオードを製作した。

40

## 【0124】

前記有機発光ダイオードを、ITO/NPB(70nm)/TCTA(10nm)/EML(実施例1の化合物(93重量%)+Ir(PPh<sub>3</sub>)<sub>3</sub>(7重量%))、30nm/BAlq(5nm)/Alq<sub>3</sub>(20nm)/LiF(0.5nm)/Al(150nm)の構造で製作した。

## 【0125】

比較例1

前記実施例1で合成された化合物の代わりに、4,4'-N,N'-ジカルバゾールビフェニル(CBP)を発光層のホストとして使用したことを除いては前記実施例3と同様

50

な方法で有機発光ダイオードを製作した。

【0126】

実験例1：有機発光ダイオードの性能評価

前記実施例3および比較例1で製作された有機発光ダイオードに対して電圧による電流密度の変化、輝度の変化および発光効率を測定した。具体的な測定方法は次のとおりであり、その結果は下記表1に示した。

【0127】

(1) 電圧変化による電流密度の変化の測定

電圧を0Vから10Vまで上昇させながら電流-電圧計(Keithley 2400)を利用して電流値を測定した。その結果を図6に示した。

10

【0128】

(2) 電圧変化による輝度の変化の測定

製造された有機発光ダイオードに対して、電圧を0Vから10Vまで上昇させながら輝度計(Minolta CS-1000A)を利用して輝度を測定して結果を得た。その結果を図7に示した。

【0129】

(3) 発光効率の測定

前記(1)および(2)で測定された輝度と電流密度および電圧を利用して同一の明るさ(2000 cd/m<sup>2</sup>)の電流効率(cd/A)および電力効率(1m/W)を計算した。その結果を図8および9に示した。

20

【0130】

(4) 色座標

輝度計(Minolta CS-100A)を利用して色座標を測定し、その結果を下記表1に示した。

【0131】

【表1】

素子の種類	発光層のホスト物質	2000 cd/m <sup>2</sup> での測定結果			
		駆動電圧(V)	電流効率(cd/A)	電力効率(1m/W)	色座標(x, y)
実施例3	実施例1	7.2	51.8	22.6	0.308, 0.622
比較例1	CBP	8.2	49.2	18.8	0.295, 0.622

30

【0132】

前記表1を参照すれば、有機発光ダイオードの特性評価結果、実施例3で製造された有機発光ダイオードは比較例1の有機発光ダイオードに比べて、駆動電圧は約1V低く、電流効率および電力効率は極めて改善された素子性能を示すことを確認することができた。前記実施例1による化合物は有機発光ダイオードの駆動電圧を下げ、輝度と効率を向上させることを確認することができた。

40

【0133】

本発明は、現在考えられる実施例に基づき記載されているが、本発明は前記実施例に限定されるものではなく、特許請求の範囲の精神および範囲に含まれる多様な変形および等価の形態で行われうる。したがって、上記の実施例は例示的なものであり、本発明をいかようにも限定するものではないことを理解しなければならない。

【符号の説明】

【0134】

100、200、300、400、500 有機発光ダイオード、

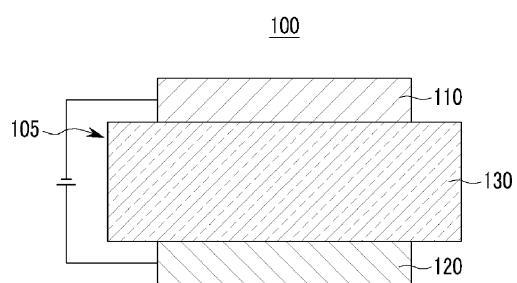
105 有機薄膜層、

110 陰極、

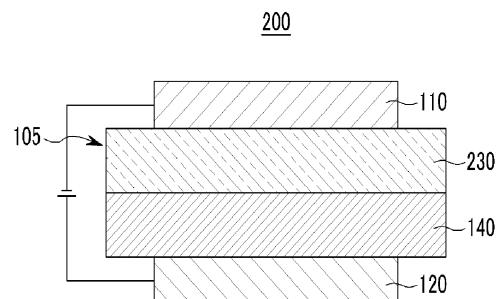
50

- 1 2 0 陽極、  
 1 3 0 発光層、  
 1 4 0 正孔輸送層 (HTL)、  
 1 5 0 電子輸送層 (ETL)、  
 1 6 0 電子注入層 (EIL)、  
 1 7 0 正孔注入層 (HIL)、  
 2 3 0 発光層 + 電子輸送層 (ETL)。

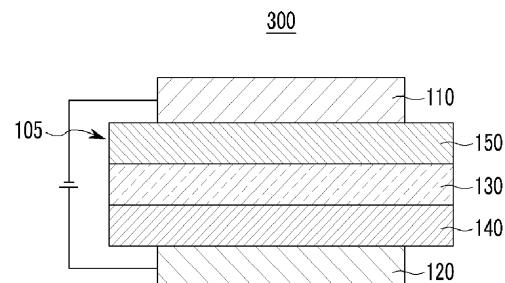
【図 1】



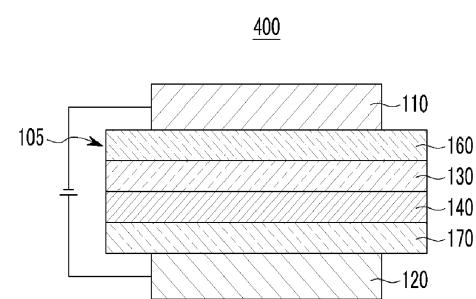
【図 2】



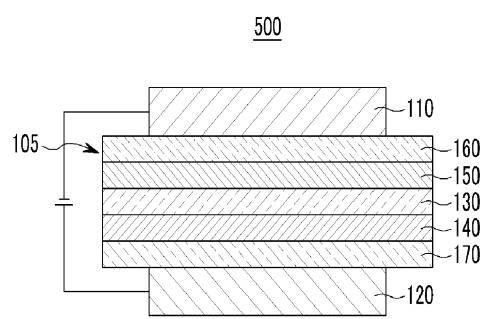
【図 3】



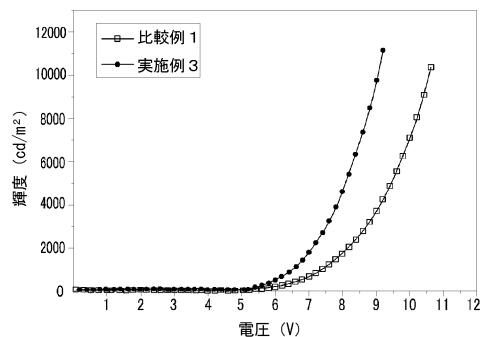
【図 4】



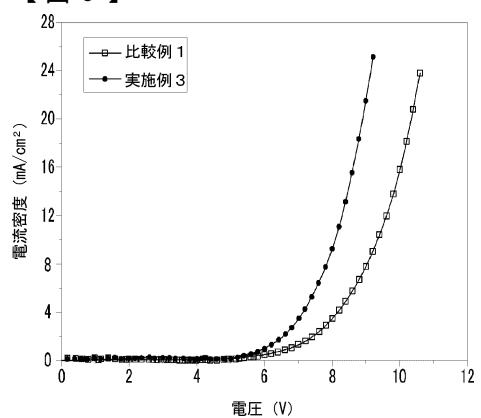
【図5】



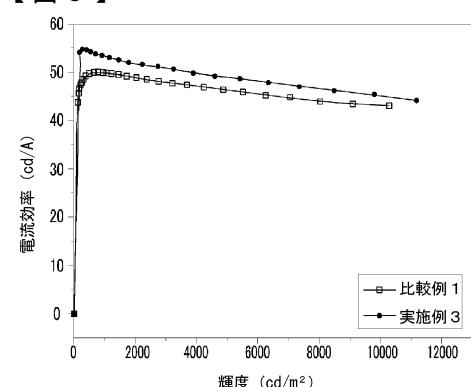
【図7】



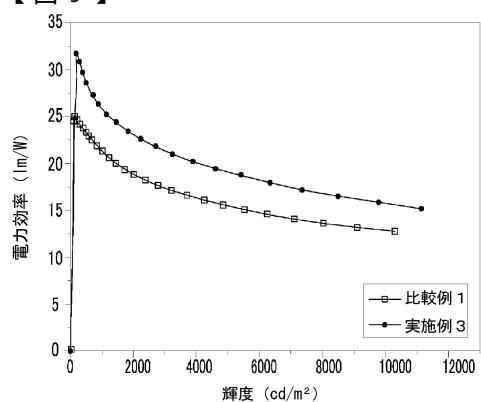
【図6】



【図8】



【図9】



---

フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

G 09 F 9/30 365

(72)発明者 キム,ヨン-フン

大韓民国, 437-711 キョンギ-ド, イワン-シ, コチョン-ドン 332-2, チェイル  
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72)発明者 キム,ヒュン-スン

大韓民国, 437-711 キョンギ-ド, イワン-シ, コチョン-ドン 332-2, チェイル  
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72)発明者 イ,ホ-ジエ

大韓民国, 437-711 キョンギ-ド, イワン-シ, コチョン-ドン 332-2, チェイル  
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72)発明者 ユ,ウン-スン

大韓民国, 437-711 キョンギ-ド, イワン-シ, コチョン-ドン 332-2, チェイル  
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72)発明者 チエ,ミ-ヨン

大韓民国, 437-711 キョンギ-ド, イワン-シ, コチョン-ドン 332-2, チェイル  
インダストリーズ インコーポレイテッド

審査官 池田 博一

(56)参考文献 米国特許出願公開第2008/0124455(US, A1)

特開2006-083386(JP, A)

国際公開第2010/136109(WO, A1)

国際公開第2009/124627(WO, A1)

国際公開第2010/083873(WO, A1)

特表2012-528088(JP, A)

特表2011-521894(JP, A)

特表2012-515734(JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H 01 L 51/50

H 01 L 27/32

C 07 D 403/04

Caplus/REGISTRY(STN)

专利名称(译)	有机光电器件的化合物，含有该化合物的有机发光二极管		
公开(公告)号	<a href="#">JP5746162B2</a>	公开(公告)日	2015-07-08
申请号	JP2012517398	申请日	2010-06-25
[标]申请(专利权)人(译)	第一毛织株式会社		
申请(专利权)人(译)	第一毛织公司		
当前申请(专利权)人(译)	第一毛织公司		
[标]发明人	ジュンスンヒュン キムヨンフン キムヒュンスン イホジエ ユウンスン チエミヨン		
发明人	ジュン,スン-ヒュン キム,ヨン-フン キム,ヒュン-スン イ,ホ-ジエ ユ,ユン-スン チエ,ミ-ヨン		
IPC分类号	H01L51/50 C07D403/04 C09K11/06 G09F9/30 H01L27/32		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D401/04 C07D401/14 C07D403/04 C07D403/14 C09B57/00 C09B57/008 C09K11/06 C09K2211/1011 C09K2211/1018 C09K2211/1029 C09K2211/1074 H01L51/0067 H01L51/42 H01L51/50 H05B33/14 Y10S428/917		
FI分类号	H05B33/14.B H05B33/22.B H05B33/22.D C07D403/04 C09K11/06.690 G09F9/30.365		
审查员(译)	池田弘		
优先权	1020090057234 2009-06-25 KR		
其他公开文献	JP2012531737A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

## 摘要(译)

本发明提供一种有机光电装置用化合物，其中，由下述化学式1至3表示的取代基依次组合，并且包含该化合物的有机光电装置。在说明书中描述了上述化学式1至3的定义。用于有机光电装置的化合物具有优异的热稳定性，特别是可以应用于有机光电装置的有机薄层，因此可以提供在低电压下具有高发光效率和改善寿命的有机光电装置和显示装置 - 跨度。

(21)出願番号	特願2012-517398 (P2012-517398)	(73)特許権者	500005066 チエイル インダストリーズ インコーポ レイテッド
(86)(22)出願日	平成22年6月25日 (2010.6.25)	大韓民国	7 30-710 キョンサンブ ッド クミ-シ コンダンドン 290
(65)公表番号	特表2012-531737 (P2012-531737A)	(74)代理人	110000671 八田国際特許業務法人
(43)公表日	平成24年12月10日 (2012.12.10)	(72)発明者	ジュン, スンヒュン 大韓民国, 4 37-711 キョンギード , イワン-シ, コチョンドン 332- 2, チエイル インダストリーズ インコ -ボレイテッド
(86)国際出願番号	PCT/KR2010/004156		
(87)国際公開番号	W02010/151083		
(87)国際公開日	平成22年12月29日 (2010.12.29)		
審査請求日	平成25年4月17日 (2013.4.17)		
(31)優先権主張番号	10-2009-0057234		
(32)優先日	平成21年6月25日 (2009.6.25)		
(33)優先権主張国	韓国 (KR)		